

Секция 4 Инновационная педагогика

Бараз В.Р., Левченко В.П., Повзнер А.А., Сивов С.А.
МЕТОДИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗЛОЖЕНИЯ СТРОЕНИЯ И
ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОКРИСТАЛЛОВ

dynkovaylia@mail.ru

*ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б.Н. Ельцина»
г. Екатеринбург*

METHODOLOGICAL ASPECTS OF STATEMENT STRUCTURE AND PHYSICAL PROPERTIES OF NANOCRYSTALLS

Обсуждается последовательность изложения основ классической кристаллографии и некоторых физических свойств кристаллов и нанокристаллов в рамках курса общей физики.

Methodological aspects of statement in the course of general physics fundamentals of classical crystallography, structure and properties of ideal and real crystals and, especially, nanocrystals are discussed in this article.

В большинстве вузовских учебников общей физики данной теме уделяется явно недостаточное внимание. Существующие же учебники кристаллографии являются большими по объему, довольно трудными для усвоения студентами младших курсов и используются для изучения данной темы студентами старших курсов, изучающих материаловедение, где этой теме отводится значительно большее число часов, нежели в курсе общей физики. Хотя согласно образовательным стандартам разделу кристаллографии и кристаллического строения вещества в курсе общей физики отводится довольно значительное место.

Представляется целесообразным в рамках курса общей физики изложить первоначально теоретические основы классической кристаллографии, затем рассмотреть физические свойства кристаллов и закрепить данные положения на лабораторных и практических занятиях. В первую очередь, на наш взгляд, надлежит дать основные положения теории строения идеального кристалла, рассмотреть элементы его симметрии, описать кристаллографические системы (сингонии), уделить внимание анализу наиболее известных кристаллических структур, в том числе характерных для металлических материалов, а также привести принятую классификацию кристаллов в зависимости от типа химических связей.

Далее следует перейти к описанию структуры реального кристалла, т.е. обсудить различные типы дефектов кристаллического строения, описать их влияние на многие важнейшие свойства материалов – деформационное поведение, упрочнение, диффузионную способность, структурные изменения при термическом воздействии и пр. Представляется уместным уделить внимание нанокристаллам. Дело в том, что важным фактором, оказывающим существенное влияние на свойства материалов, является размерность структурных элементов. При переходе от одной размерной категории к другой может наблюдаться скачкообразное изменение физико-механических свойств. Так, уменьшение характерных размеров морфологических единиц (отдельных частиц, зерен поликристаллов, полостей, включений других фаз) до масштабов менее 100 нм приводит к резкому изменению свойств. При этом каждый раз снижение r на порядок (от 100 до 10 нм, затем от 10 до 1 нм и в конце концов до атомного размера, т.е. $\sim 0,1$ нм) создает принципиально иное структурное состояние и вызывает действие новых причин, стимулирующих усиливающееся нарастание отличий от массивных образцов того же вещества.

Нанокристалл – отдельный однородный кристалл, имеющий непрерывную кристаллическую решетку, характеризующийся анизотропией свойств и имеющий размеры (хотя бы один) ≤ 100 нм. Вообще говоря, любой материал с характерными размерами менее 1 микрометра следует относить к наночастицам, а не к нанокристаллам. Например, любую частицу, в которой присутствует упорядоченная область, следует относить к наночастице или нанокластеру в зависимости от количества измерений в пространстве. В случае трехмерного расположения атомов в пространстве элемента твердого вещества логично вытекает название — нанокристалл. Эти материалы имеют большой технологический потенциал, так как многие их электрические и термодинамические свойства зависят от их размеров и, следовательно, могут контролироваться во время технологического процесса. Кристаллические наночастицы, образуя монокристаллические системы, интересны для изучения макроскопических кристаллов из-за отсутствия дефектов и межзеренных границ. Полупроводниковые нанокристаллы с размерами менее 10 нм также известны как квантовые точки.

Идеальный нанокристалл — это трёхмерная частица совершенной структуры, лишенная всех дефектов строения, скорее это математический объект, имеющий полную, свойственную ему симметрию, идеально гладкие грани и т. д. Идеальный нанокристалл (кристалл) является теоретической моделью, широко используемой в теории твердого тела. Реальный нанокристалл всегда содержит различные дефекты, неровности на гранях и пониженную симметрию вследствие воздействия окружающей среды. Реальный нанокристалл вообще может не обладать кристаллографическими гранями, но у него сохраняется главное свойство — закономерное положение атомов в решётке. Основным отличительный признак свойств кристаллов в том числе и нанокристаллов — их анизотропия, то есть зависимость их свойств от направления, тогда как в изо-

тропных (жидкостях, аморфных твёрдых телах) или псевдоизотропных (поликристаллы) тела свойства от направлений не зависят.

Фуллерен – это новая природная форма существования углерода наряду с давно известными его структурными модификациями – алмазом и графитом (рис. 1). Особенность строения фуллерена в том, что атомы углерода формируют высокосимметричную молекулу C_{60} . В свою очередь эти молекулы могут образовать кристалл *фуллерит* с гранецентрированной кубической решеткой и достаточно слабыми межмолекулярными связями. В этом кристалле имеются октаэдрические и тетраэдрические поры, в которых могут находиться примесные атомы. Если октаэдрические поры заполнены ионами щелочных металлов (Na, K, Rb, Cs), то при температурах ниже комнатной структура этих веществ перестраивается и образуется новый полимерный материал. Если же заполнить также и тетраэдрические поры, то образуется сверхпроводящий материал с критической температурой 20–40 К. Существуют фуллериты и с другими присадками, придающими материалу уникальные свойства.

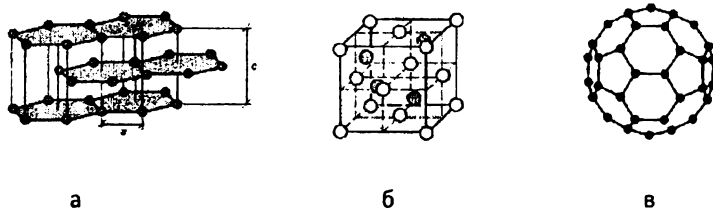


Рис. 1. Кристаллическая решетка графита (а), алмаза (б) и структура фуллерена (в)

Из углерода можно получить молекулы с гигантским числом атомов. Например, удается построить молекулу, представляющую собой однослойную трубку с диаметром около нанометра и длиной в несколько десятков микрон – так называемые углеродные нанотрубки (рис. 2). На поверхности трубки атомы углерода расположены в вершинах правильных шестиугольников. Концы же трубки закрыты с помощью правильных пятиугольников. Комбинации таких многоугольников позволяют получать разнообразные формы углеродных поверхностей в трехмерном пространстве. Геометрия этих наноконструкций определяет их уникальные физические и химические свойства и, следовательно, возможность существования принципиально новых материалов и технологий их производства. В нанотрубках, как и в самих фуллеренах, внутренние полости могут быть заполнены примесными атомами, и такая структурная комбинация с легирующими элементами способна придавать наноматериалам резко меняющиеся свойства.

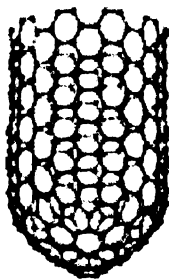


Рис. 2. Углеродная нанотрубка

Достаточно непривычной дается картина строения межзеренной границы. Предполагается, что структурное состояние атомов, формирующих границы раздела, отличается от пространственного расположения атомов как кристаллических, так и аморфных твердых тел. Структурное разупорядочение границ столь велико, что оно не предполагает сохранения даже ближнего порядка. Схематическое изображение нанокристаллического материала показано на рис. 3. Отчетливо выделяются обе структурные компоненты – кристаллическая, включающая атомы, размещенные внутри кристаллитов с сохранением дальнего порядка, и межкуристаллитная, сформированная из беспорядочно расположенных атомов. При этом относительная доля межкуристаллитной составляющей может достигать 50 % от объема всего нанокристаллического материала (для обычных же поликристаллов этот показатель в пределах 10^{-7} – 10^{-2} %).

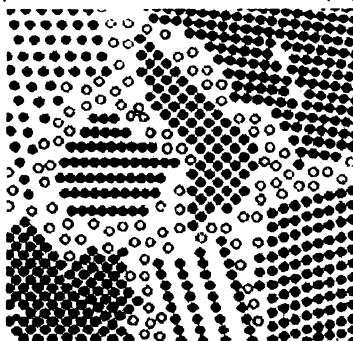


Рис. 3. Структура нанокристаллического материала. Зачерненные и светлые кружочки – соответственно атомы кристаллитов и межзеренных границ (Зигель)

Таким образом, применительно к наноматериалам можно говорить, что их структура представляет собой некую комбинацию из участков беспорядоч-

но расположенных атомов в пространстве, ограниченных различно ориентированными кристалликами (т.е. не зерна разделены границами, а ровно все наоборот). В результате общее структурное состояние можно характеризовать как близкое к аморфному – сочетаются участки «хорошего» материала (сами кристаллиты, которые из-за малости размеров допустимо рассматривать в виде объемов с ближним порядком) и «плохого» материала (разупорядоченные межзеренные прослойки).

Как уже отмечалось, в поликристаллических материалах на сопротивление пластическому деформированию сильное влияние оказывают границы зерен. Их измельчение усиливает барьерный эффект для движущихся дислокаций, поэтому одним из радикальных способов создания высокопрочного состояния является получение мелкозернистой структуры. Причем чем мельче зерно, тем выше характеристики прочности. Эта зависимость прямо следует из анализа соотношения Холла-Петча (2.16), устанавливающего обратную связь между пределом текучести σ_T , с одной стороны, и размером зерна d , с другой:

$$\sigma_T = \sigma_0 + k/\sqrt{d}.$$

Вместе с тем существует мнение, что в материалах с супермелкими зернами, размер которых оказывается в нанометровом диапазоне (около 10 нм), картина меняется на обратную – последующее измельчение зерен приводит уже к снижению сопротивления пластическому течению. Схематически такая зависимость показана на рис. 4.

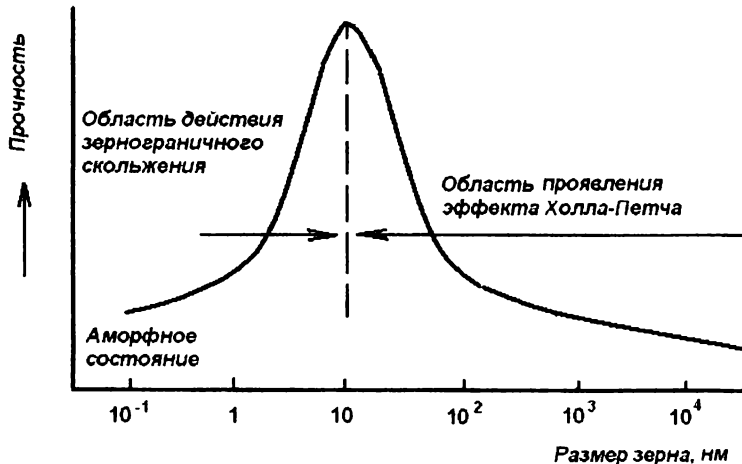


Рис. 4. Схематическое изображение зависимости прочности поликристаллического материала от размера зерна

Предполагается, что такое принципиально иное поведение сильно измельченного материала обусловлено изменением механизма деформации. В

таких невероятно малых по объему кристаллитах плотность дислокаций (внутризеренных) оказывается очень низкой. В этих условиях пластическая деформация наряду с внутризеренным дислокационным скольжением будет осуществляться путем активного зернограничного проскальзывания, что вызовет менее выраженное деформационное упрочнение. При большем измельчении зерна деформация фактически могут идти только по типу вязкого течения (без участия дефектов структуры), что характерно для аморфного состояния. Таким образом, из сказанного следует, что существует некоторое пороговое (критическое) значение размера зерна, выше которого зернограничный фактор способен оказывать хорошо знакомое воздействие на деформируемость поликристаллического материала. Однако при величине зерна, оказывающегося ниже этого критического размера, зависимость становится обратной.

Таким образом, изложение теоретических основ кристаллографии и физических свойств кристаллов и нанокристаллов позволит, на наш взгляд, сформировать у студентов современные представления о строении и физических свойствах твердых тел.

1. Новиков И.И. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. / И.И. Новиков, К.М. Розин // – М.: Металлургия, 1990. – 336 с.
2. Повзнер А.А. Физика твердого тела. Свойства кристаллической решетки. методические указания по физике / А.А. Повзнер, В.Ю. Бодряков. // – Екатеринбург: Изд-во УГТУ–УПИ, 2000. – 19 с.
3. Перспективные материалы. Структура и методы исследования: учеб. пособие / Под ред. Д.Л. Мерсона. М. : ТГУ, МИСиС, 2006. – 536 с.

Бернгардт К.В., Исаев А.П., Фомин Н.И.
РАЗРАБОТКА И РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА
ПРОЕКТИРОВАНИЯ МОДУЛЕЙ ОСНОВНЫХ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ БАКАЛАВРИАТА

Aleksander_isaev@net-burg.net

*ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б.Н. Ельцина»*

г. Екатеринбург

Доклад посвящен построению универсального алгоритма проектирования учебных модулей основной образовательной программы бакалавриата для реализации компетентностного подхода в высшем образовании. Апробация алгоритма проведена на примере проектирования модулей основной образовательной программы по направлению 270800 «Строительство» профиль подготовки «Проектирование зданий и сооружений».